

МИКРОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ МАНТИИ ПЫЛЕВОЙ ЧАСТИЦЫ В УСЛОВИЯХ МЗС

Н. А. Сатонкин, А. И. Васюнин, А. Б. Островский
Уральский федеральный университет

В работе рассматривается вопрос о микроскопическом безрешеточном моделировании эволюции мантии пылевой частицы в условиях межзвездной среды. Проведено моделирование с учетом таких физических процессов, как аккреция, десорбция и миграция по поверхности пыли. Потенциал поверхности определен при помощи поля Леннард-Джонса.

OFF-LATTICE MICROSCOPIC MODELLING OF DUST GRAIN MANTLE IN ISM

N. A. Satonkin, A. I. Vasyunin, A. B. Ostrovskii
Ural Federal University

We introduce an off-lattice method for modelling of evolution of dust grain mantle under typical conditions in the interstellar medium. Accretion, thermodesorption and thermodiffusion processes in grain mantle are taken into account. Surface potential is determined using Lennard-Jones field for mantle particles.

В работе рассматривается вопрос о микроскопическом безрешеточном моделировании эволюции мантии пылевой частицы в условиях межзвездной среды (МЗС). Поверхность пылевой частицы является катализатором для многих процессов в межзвездной среде [1], поэтому очень важно понимать, как она формируется и как происходит движение атомов и молекул по ней. До сих пор большинство попыток подобного моделирования основывались на использовании регулярных сеток (решеток), когда предполагается разбиение поверхности частицы на регулярные области квадратного сечения, границы которых имитируют замкнутые области пылинки. Это и есть моделирование на решетке (сеточный подход), идея которого предполагает, что атомы и молекулы передвигаются между предопределенными узлами. Барьеры диффузии и энергии связывания для ячеек зависят от парных взаимодействий в соседних квадратных областях. Но этот подход не позволяет получить полноценное

представление о морфологии пылевой частицы. Безрешеточный подход требует информации, касающейся возможных путей диффузии частицы на поверхности, а также определения места ее окончательного положения, так как эти соображения больше не будут заданы фиксированной решеткой, что серьезно увеличивает вычислительную нагрузку и усложняет сами расчеты.

Для реализации задачи был написан программный код, основанный на подходах, описанных в [2–4]. В работе проведено моделирование с учетом таких физических процессов, как аккреция, десорбция и миграция по поверхности пыли в поле потенциала поверхности, определяемого как потенциал Леннарда-Джонса [5]. Полученные результаты с учетом различных процессов, в разных условиях межзвездной среды представлены в докладе.

Библиографические ссылки

1. *Tielens A. G. G. M.* The Physics and Chemistry of the Interstellar Medium. — 2005.
2. *Garrod R. T.* Three-dimensional, Off-lattice Monte Carlo Kinetics Simulations of Interstellar Grain Chemistry and Ice Structure // *Astrophys. J.* — 2013. — Vol. 778. — P. 158. 1310.2512.
3. *Gillespie Daniel T.* Exact stochastic simulation of coupled chemical reactions // *The Journal of Physical Chemistry.* — 1977. — Vol. 81, № 25. — P. 2340–2361. <https://doi.org/10.1021/j100540a008>.
4. *Cuppen H. M., Garrod R. T.* Modelling of surface chemistry on an inhomogeneous interstellar grain // *Astron. Astrophys.* — 2011. — Vol. 529. — P. A151.
5. *Jones J. E.* On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.* — 1924. — Vol. 106, № 738. — P. 463–477.